

Comité d'évaluation du laboratoire MAS Ecole Centrale Paris

Axe de Recherche
Ingénierie Scientifique et Visualisation (ISV)

Florian De Vuyst

Ingénierie Scientifique et Visualisation

- ISV 1 DORA Dimension, Optimisation, Réduction et Apprentissage pour les problèmes de fluides (Florian De Vuyst)
- ISV2 Ingénierie de systèmes complexes (Christian Saguez)
- ISV3 DIGIPLANTE : Modélisation et simulation pour les sciences de l'environnement (Paul-Henry Cournède)
- ISV4 WYSIWYG : Synthèse d'images – Réalité Virtuelle et Simulation (Patrick Callet)

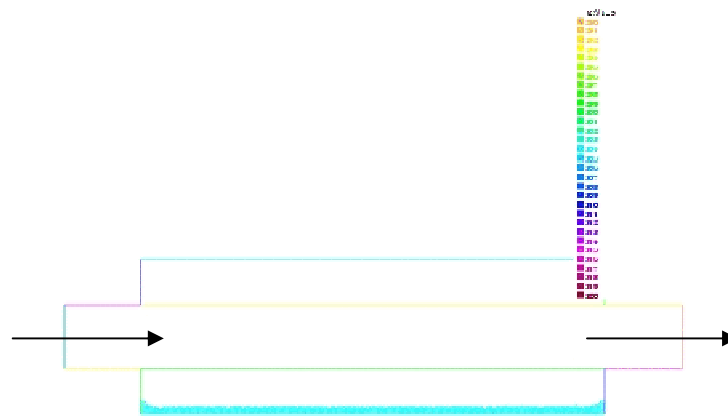
Les enjeux de la Recherche en calcul numérique aujourd'hui

- Physique complexe
- Aspects pluridisciplinaires
- Estimation (robuste) de paramètres
- Assimilation de données
- Conception / optimisation de systèmes
- Prise en compte des incertitudes
- Rendu
- Temps réel

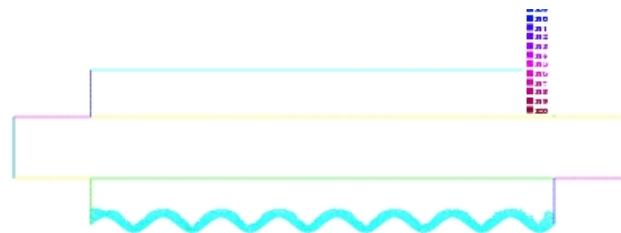
“Physique complexe” - Exemples de problèmes de fluides considérés

- Volumes finis pour les fluides compressibles [JCP 2004, ESAIM Proc. 08, E. J. Mech B Fluids 08]
- Fluides multiphasiques, CEA Saclay [Award ICONE 2004, Nucl. Design 2008]
- Moulage par injection de thermoplastiques, RNTL, PEP
- Interprénétration de plasmas, CEA DAM [JCP 2007]
- Trafic routier, ACI MD 2003, U. Dauphine, INRETS [Award EGC 2007, Proc. Trans. Res. Board]
- Plasma magnétosphérique, CEA DAM [CPC 2006]
- Fluides magnétisés, Doshisha U., Kyoto [J. Phys. Cond Mat., J Mech. Eng . Sci. 2008]
- Migration/prolifération cellulaire, F. Xavier, Institut Curie, Institut Carnot Supélec
- Modèles réduits pour les fluides, ANR OMD, CSDL [IJNME 2008, Chap. Hermès et Wiley]
- Biochimie moléculaire dynamique stochastique, Paris 6, ANR CI PITAC [DDM 2008]
- Modèles Temps Réel de systèmes (PPF TAMARIS, ENS Cachan)
- Conception collaborative pour les problèmes à base de fluides (CSDL, Dassault)
- CO2 transcritique/supercritique (Doshisha U.)
- Modèles fluides de flux d'informations [Comp. Networks 2008]

Coll. France – Japon (+ Chine en projet) Conception optimale de systèmes de conversion d'énergie



Ecoulement de fluide CO2
en état transcritique



Devenir des doctorants & postdocs (ISV1)

- Christophe Audouze Postdoc labo EM2C ECP
- Fatima Daim CDI IR ENSAM Paris
- Cédric Enaux CDI Ingénieur CEA Bruyères (ECP 2004)
- Lucie Fréret CDI IR CNRS Paris
- Pascal Jaisson PRAG U. Versailles
- Marc Joliveau Post-doc Montréal
- Solène Le Bourdiec CDI Ingénieur EDF R&D
- Takuya Kuwahara Post-doc ENS Cachan & Osaka U.
- Michael Ndjinga CDI Ingénieur CEA Saclay (ECP 2003)

Un zoom : L'initiative Complex System Design Lab (CSDL)

Présentation F. De Vuyst
Responsable ECP du projet CSDL

Le projet CSDL

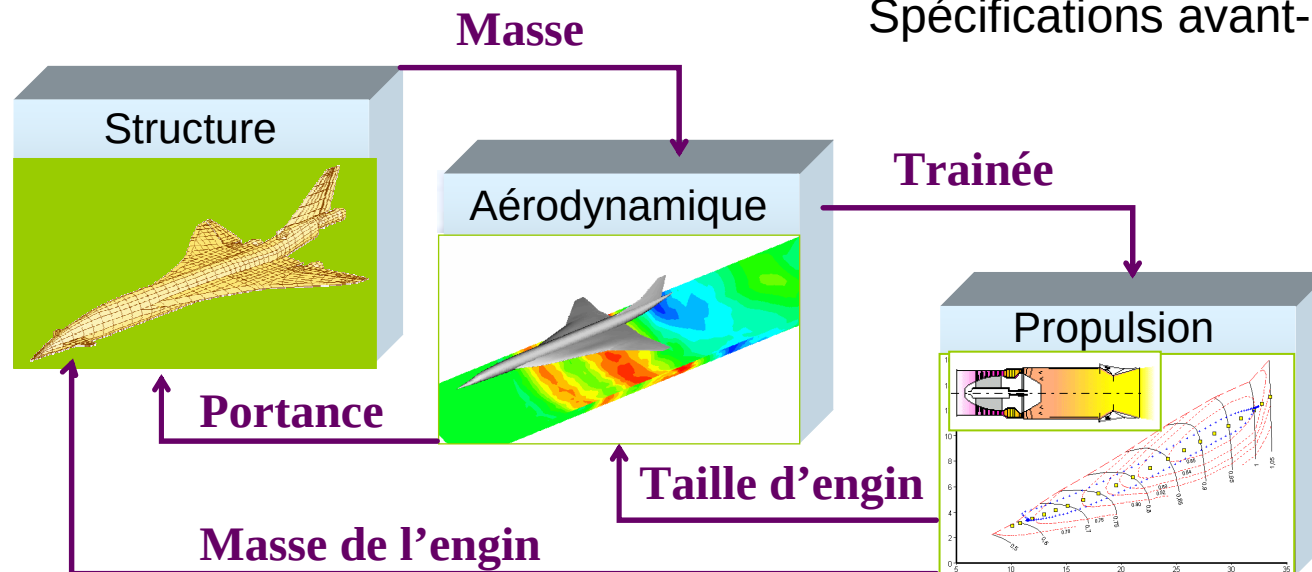
*Mettre en place un environnement collaboratif
d'aide à la décision pour la conception de systèmes complexes*

Industrie et services			Centre de recherche	
Grand Groupes	ME	PME	Recherche publique	Centre de Recherche
Dassault-Aviation	CS	Distene	Digiteo/Scilab	ONERA
EADS	ANSYS	EnginSoft	ESILV	ARMINES
MBDA	ESI Group	Eurodécision	INRIA	Supelec
Bull	LMS-Imagine	Oxalya	ECP	
Alcatel Lucent		Samtech	ENS Cachan	
EDF		HPC-Projet		
Thales		Logilab		
Renault				
Dassault-Systèmes				

Pilote : Dassault Aviation

Exemple : la conception avant-projet d'avion

Spécifications avant-projet

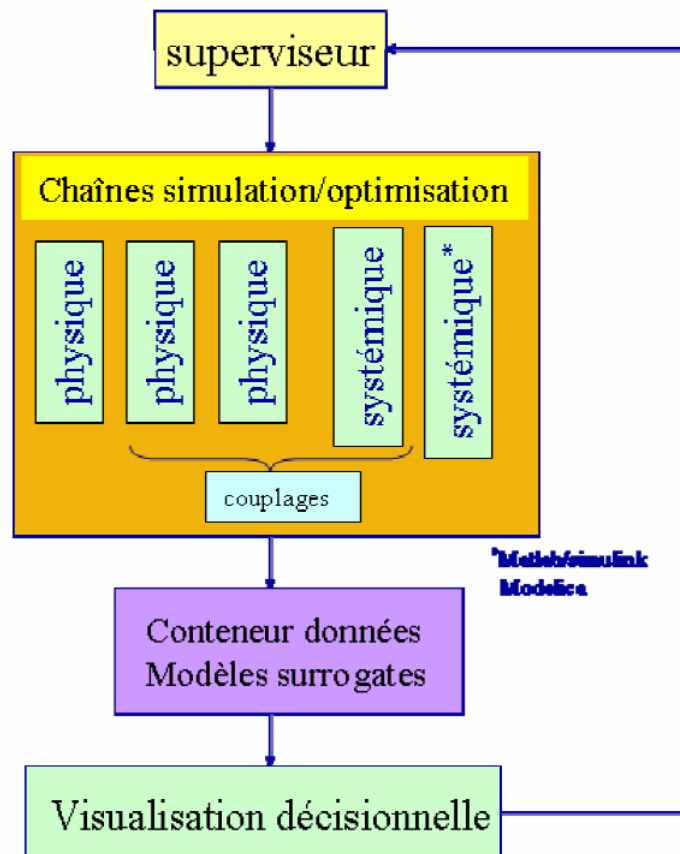


Images Dassault Aviation

Processus de dimensionnement

Conception avant-projet :
*gérer les paramètres de conception
entre disciplines*

Besoins scientifiques



- Modèles réduits
- Propagation d'incertitudes
- Modèles de données
- Requêtage complexe
- Interactions multidisciplinaires
- Extraction de connaissances
- Visualisation/optimisation "on-the-fly"

Schéma du processus envisagé dans CSDL

Projet fédérateur laboratoire + partenaires

- Marie-Aude Aufaure
Modèles et Entrepôts de données
(chaire Business Objects)
- Céline Hudelot
Recherche de caractéristiques dans les
grands volumes de résultats, visualisation
- Erick Herbin
(+ Supélec + INRIA)
Prise en compte des incertitudes
Problèmes de probabilité sous jacents
- Florian De Vuyst
(+ N. Vayatis ENS Cachan)
Réduction de modèles
POD et métamodèles pour la visualisation
Optimisation/Visualisation on-the-fly
Apprentissage, Scoring / ranking

Eclairage : réduction de modèle

Paramètres de conception

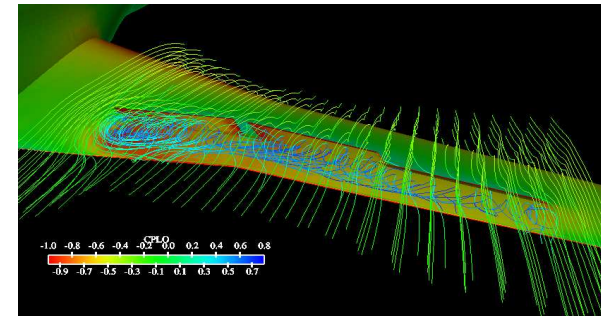


Champ Elément Finis spatial (x)

$$\theta \in \mathbb{R}^p$$



Modèle d'incertitudes Y



$$u = u(\mathbf{x}, \theta; \mathbf{Y})$$

ou
$$u = u(\mathbf{x}, \theta; \mathbf{Y}_\theta)$$

Hyp. : pour une réalisation de Y, on suppose que le champ u est régulier.

Modèle de représentation (approximation)

$$u(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}, \mathbf{Y}_\theta) \approx u_0(\mathbf{x}) + \sum_{k=1}^K a_k(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{Y}_\theta) \Psi^k(x).$$

Champ moyen

Coefficients de décomposition
= fonctions de $\boldsymbol{\theta}$ et $\mathbf{Y}_\theta$

Base spatiale

Calcul des coefficients

Si les fonctions Ψ^k sont orthonormées dans $L^2(\Omega)$, alors

$$a_k(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{Y}_\theta) = \left(u(\cdot, \boldsymbol{\theta}, \mathbf{Y}_\theta) - u_0(\cdot), \Psi^k(\cdot) \right)_{L^2(\Omega)}.$$

Processus stochastique à déterminer numériquement
(polynômes de chaos, ...)

Choix possible de base réduite spatiale

Les fonctions Ψ^k sont choisies comme modes POD.

Méthodologie :

1. Plan d'expérience numérique explorant θ et $\mathbf{Y}_\theta$
2. Base de données de solutions
3. ACP sur la base de données (choix d'un produit scalaire)

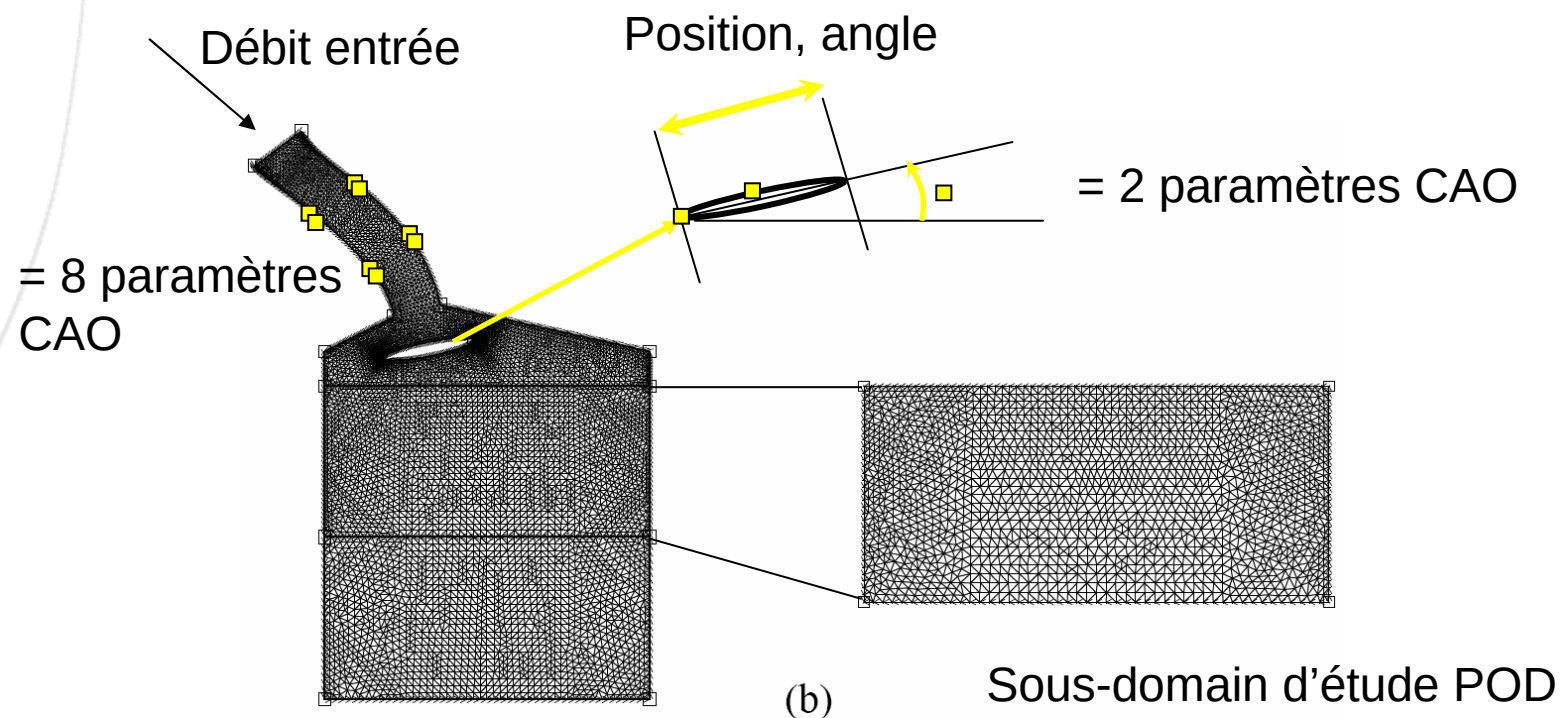
Approche non intrusive

Discussion dans le cas déterministe

$$u(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) \approx u_0(\mathbf{x}) + \sum_{k=1}^K a_k(\boldsymbol{\theta}) \Psi^k(x).$$

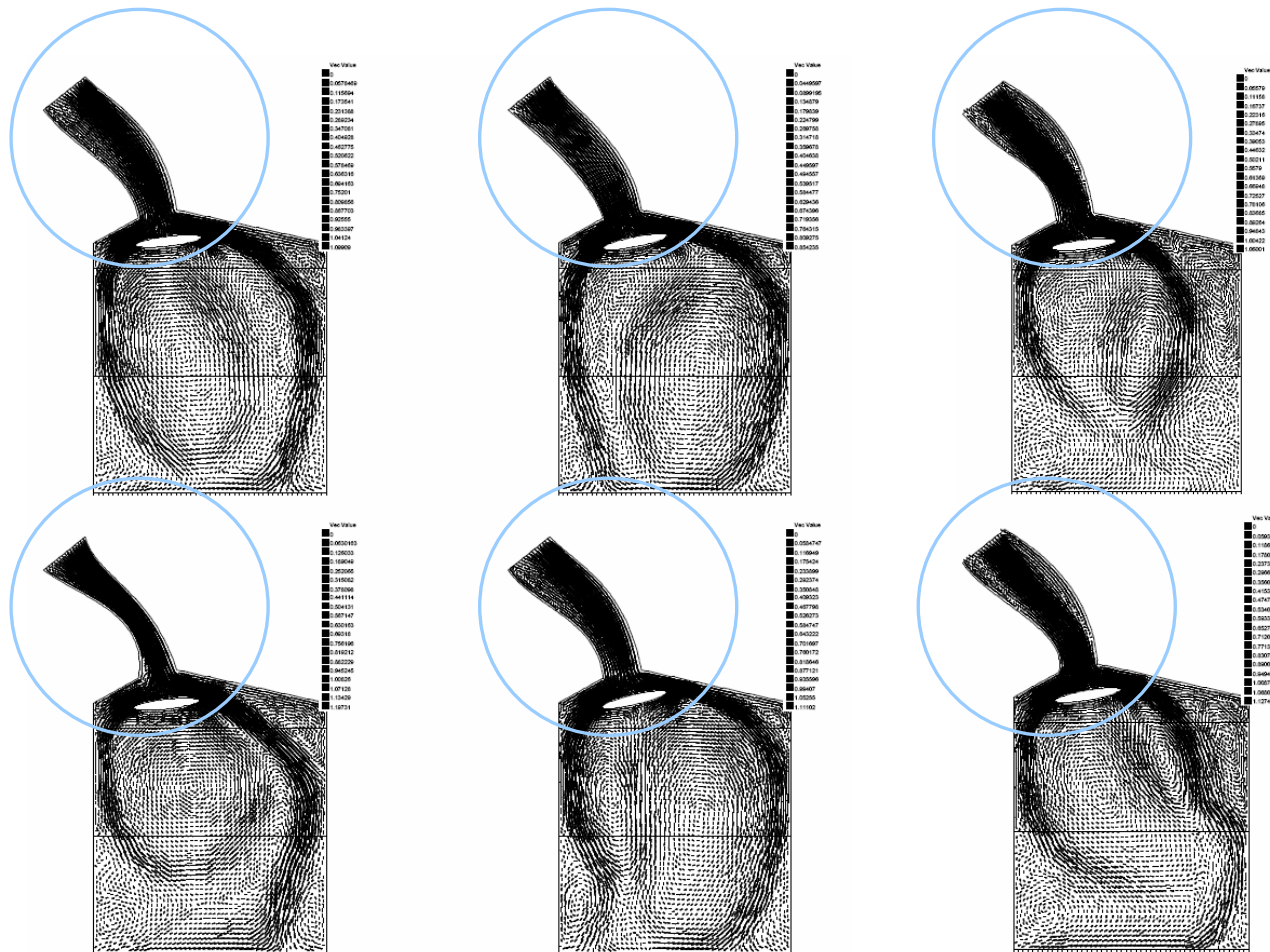
Etude de cas – Solutions de Navier-Stokes dépendant de onze paramètres

[Audouze, De Vuyst 2008]



→ Total de 11 paramètres CAO
Chaque paramètre varie dans un intervalle de conception

Plan d'expérience numérique – Exemples de solutions EF



Solutions discrètes EF paramétrées

$$u^h = u^h(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})$$

Variable
d'espace

Vecteur
paramétrique

Espace paramétrique :

$$\boldsymbol{\theta} \in [0, 1]^p$$

Q : comment construire un estimateur “rapide” de

$$\boldsymbol{\theta} \mapsto u^h(., \boldsymbol{\theta}) ?$$

Analyse Proper Orthogonal Decomposition

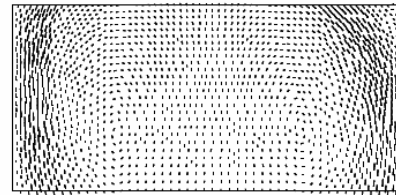
Modes POD en vitesse

λ^1 23708.3	λ^5 328.89
λ^2 3667.95	λ^6 155.382
λ^3 735.854	λ^7 145.539
λ^4 505.24	λ^8 85.2643

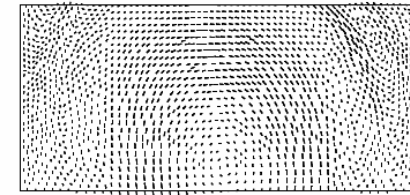
1ères v.p. de la
matrice de corrélation

Bon taux de décroissance

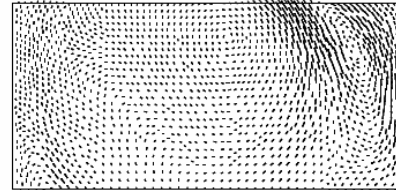
POM #1



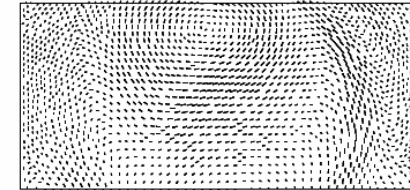
POM #2



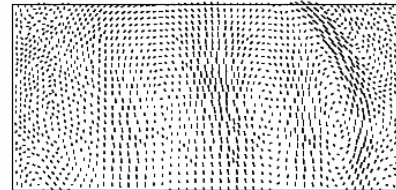
POM #3



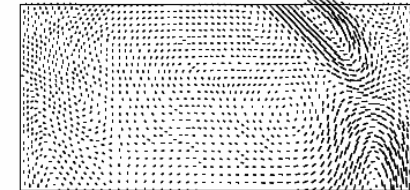
POM #4



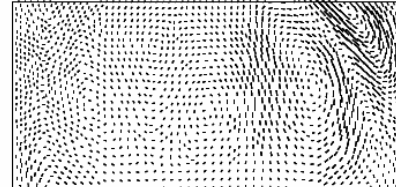
POM #5



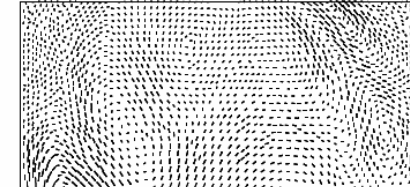
POM #6



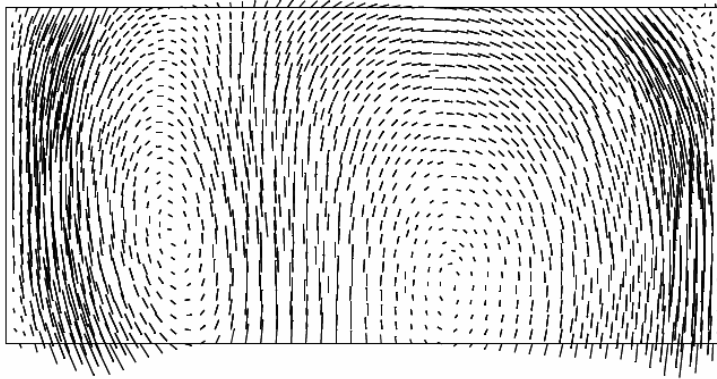
POM #7



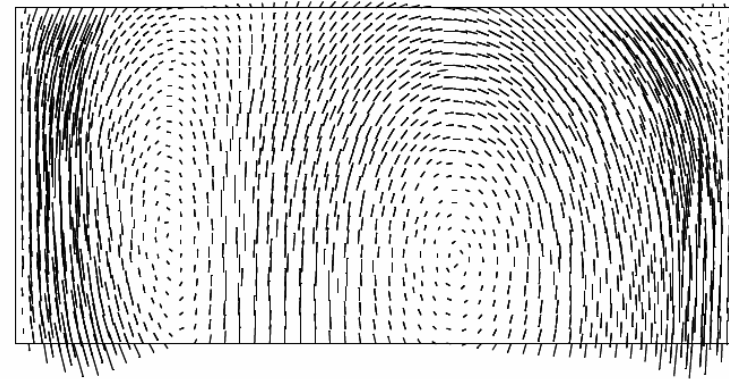
POM #8



Comparaison solution E.F. / approximation POD



$u^{\theta,h}(\mathbf{x})$



$$\Pi^K u^{\theta,h} = \sum_{k=1}^K a_k(\boldsymbol{\theta}) \Psi^{k,h}(\mathbf{x}).$$

Reconstruction avec K=5

(5 modes POD) !

Apprentissage des coefficients

1. Générer un nuage de N points θ^i dans $[0, 1]^p$ (LHS, Sobol, etc.);
2. Calculer N solutions discrètes EF $u^{i,h} = u^{\theta^i,h}$;
3. Calculer $a_k^i = a_k(\theta^i) = (u^{i,h}, \Psi^{k,h})$;
4. Interpoler/approcher les coefficients a_k dans le domaine paramétrique.

[Audouze, De Vuyst IJNME 2008]

→ Nécessite des interpolateurs/approximateurs haute dimension

Plusieurs candidats :

Polynômes

Fonctions à base radiales (RBF) [Wendland 2006]

Approches à krigeage

Moindres carrés mobiles (diffuse approximation)

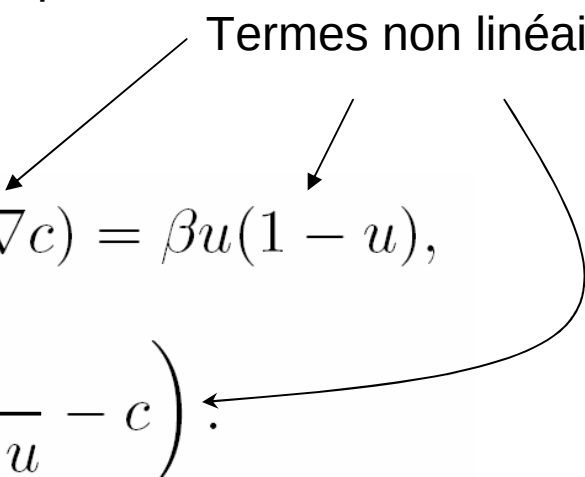
Approximation particulière type SPH, etc...

Expérimentation numérique

Système non linéaire 1D de Keller-Segel
(modélisant la formation de motifs sur la peau
de certains êtres vivants)

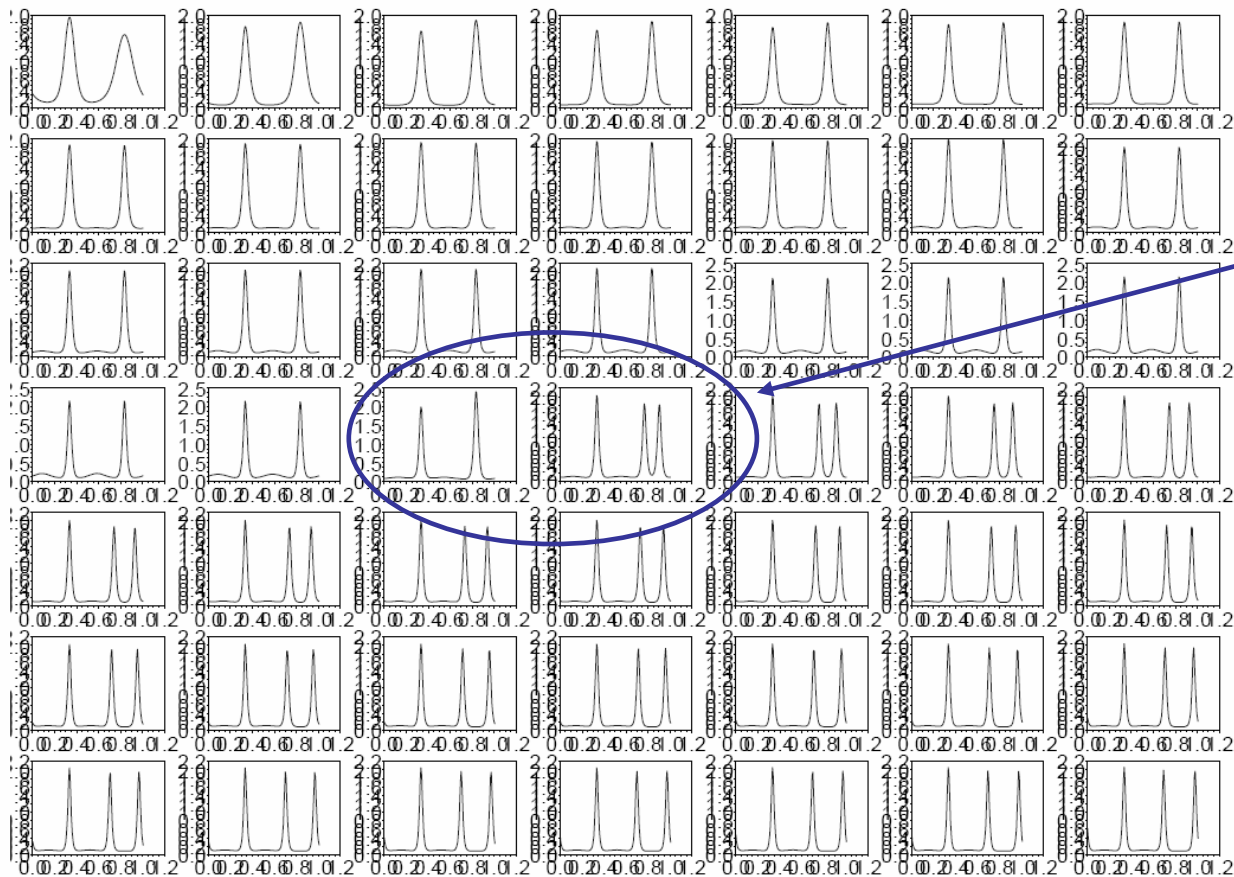
$$\begin{aligned} \partial_t u - \Delta u + \alpha \nabla \cdot (u \nabla c) &= \beta u(1 - u), \\ \partial_t c - \delta \Delta c &= \gamma \left(\frac{u}{1 + u} - c \right). \end{aligned}$$

Termes non linéaires



Structure riche des solutions dans l'espace paramétrique.

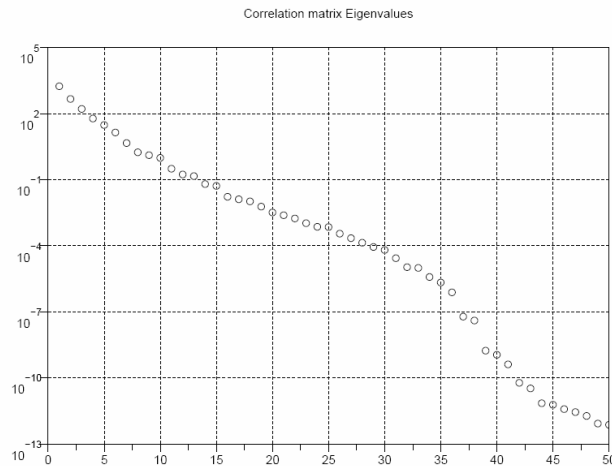
Solutions 1D stationnaire avec CL périodique



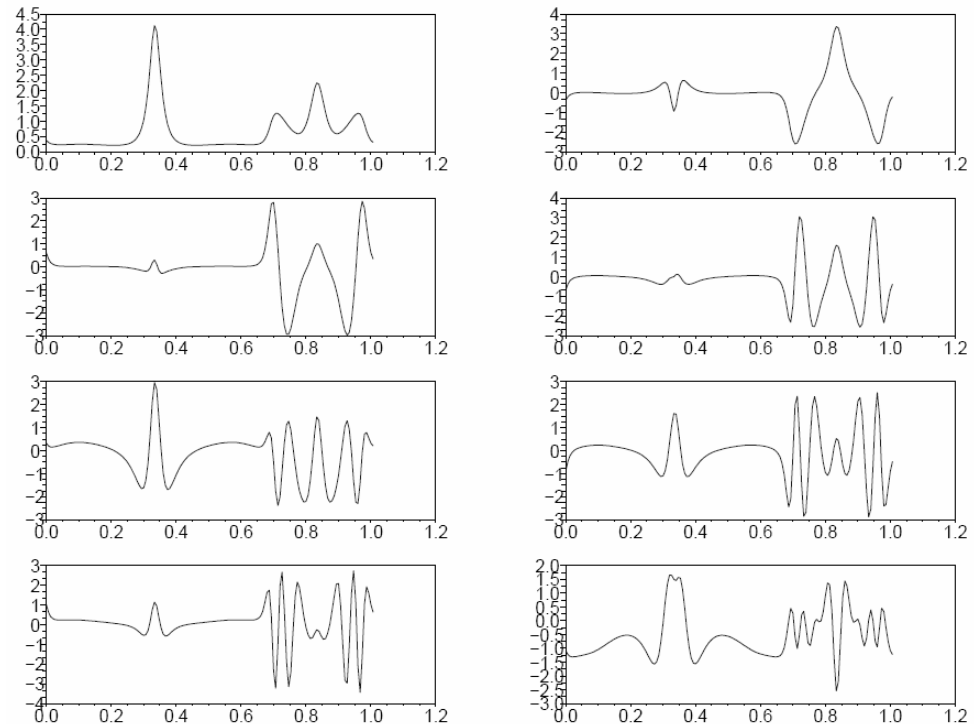
Bifurcation
paramétrique

Paramètre γ variable seulement dans cet essai.

Décomposition POD

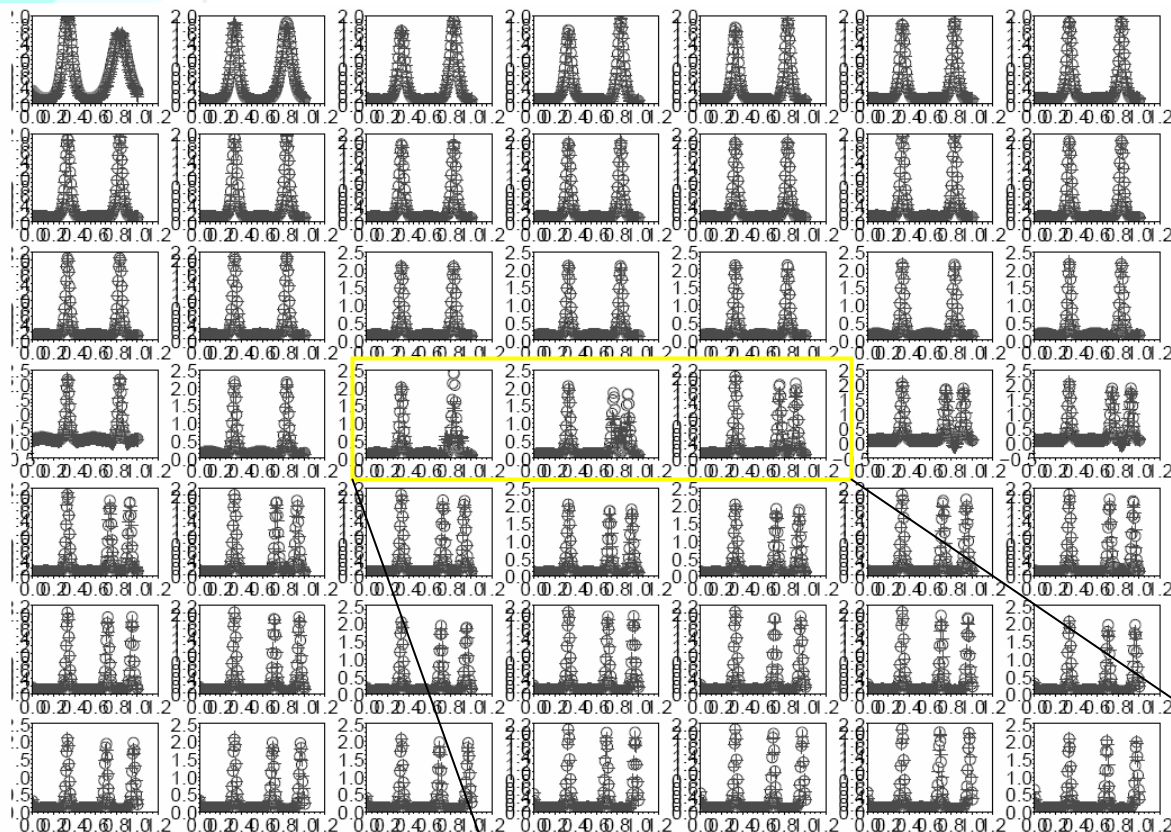


Spectre de la matrice
de corrélation



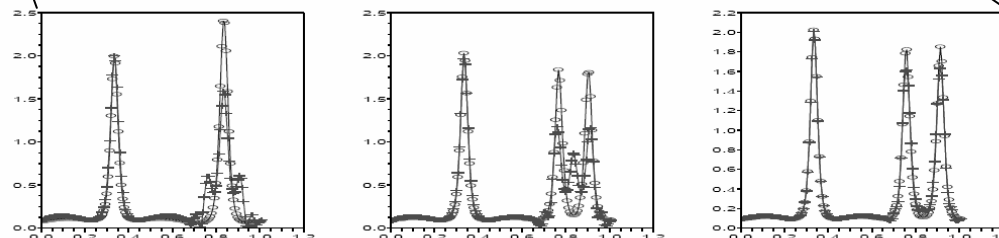
Les huit premiers modes POD

Comparaison POD-RBF ROM / Eléments finis



(en utilisant $K=6$)

Légère perte de précision
au voisinage de la bifurcation
mais restitution globale
satisfaisante



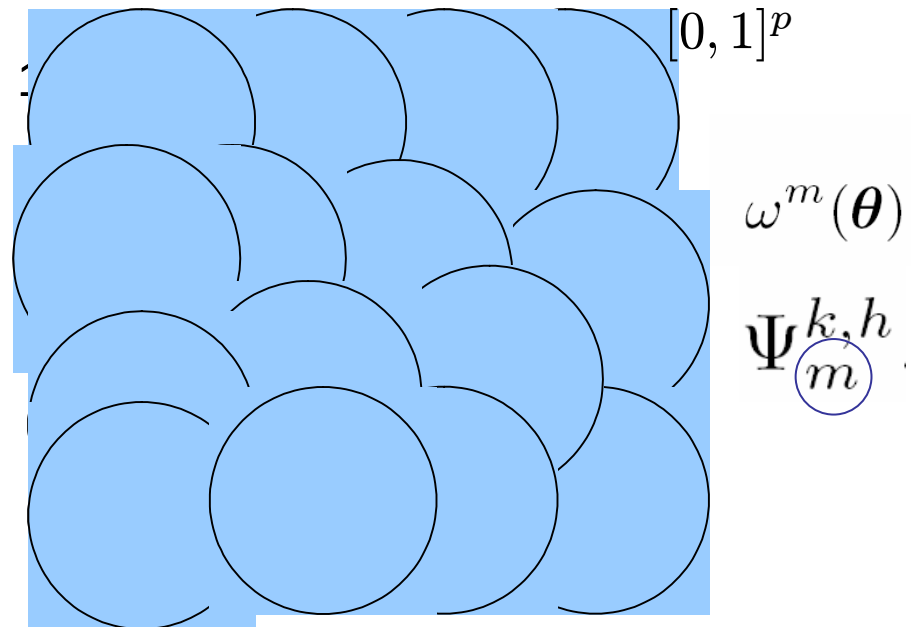
ZOOM

Proposition : base POD locale + partition de l'unité

Construction pratique d'une partition de l'unité :

$$\hat{\omega}^m(\boldsymbol{\theta}) = \Phi \left(\frac{\|\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}^{c,m}\|}{\sigma^m} \right).$$

Noyau régulier positif
à support compact



Alors $\omega^m(\boldsymbol{\theta}) = \frac{\hat{\omega}^m(\boldsymbol{\theta})}{\sum_{\ell=1}^M \hat{\omega}^{\ell}(\boldsymbol{\theta})}$ a les propriétés attendues :

$$\omega^m \geq 0, \sum_m \omega^m \equiv 1.$$

Algorithme

1. Construire une base locale POD relative à la fonction de partition n° m :

$$\min_{\substack{(\Psi_m^{1,h}, \dots, \Psi_m^{K_m,h}) \\ (\Psi_m^{k,h}, \Psi_m^{\ell,h}) = \delta_{k\ell}, 1 \leq k \leq \ell \leq K_m}} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \omega_m(\theta^i) \left\| u^{i,h} - \sum_{k=1}^{K_m} (u^{i,h}, \Psi_m^{k,h}) \Psi_m^{k,h} \right\|^2$$

Moindres carrés à poids

Reconstruction locale : $\tilde{u}^{\theta,h} = \sum_{k=1}^{K_m} (u^h(\theta), \Psi_m^{k,h}) \Psi_m^{k,h}.$

Reconstruction globale

- A partir de

$$\sum_{m=1}^M \omega_m(\boldsymbol{\theta}) = 1$$

on a l'approximation globale :

$$\tilde{u}^{\theta,h} = \sum_{m=1}^M \omega_m(\boldsymbol{\theta}) \sum_{k=1}^{K_m} (u^h(\boldsymbol{\theta}), \Psi_m^{k,h}) \Psi_m^{k,h}.$$

de la forme

$$\hat{u}^{\theta,h} = \sum_{m=1}^M \sum_{k=1}^{K_m} \hat{a}_m^k(\boldsymbol{\theta}) \Psi_m^{k,h}$$

Approximateurs RBF

Un élément d'analyse numérique (cas d'un problème d'évolution)

Approximation POD

Most of the information
contained here

- Soit

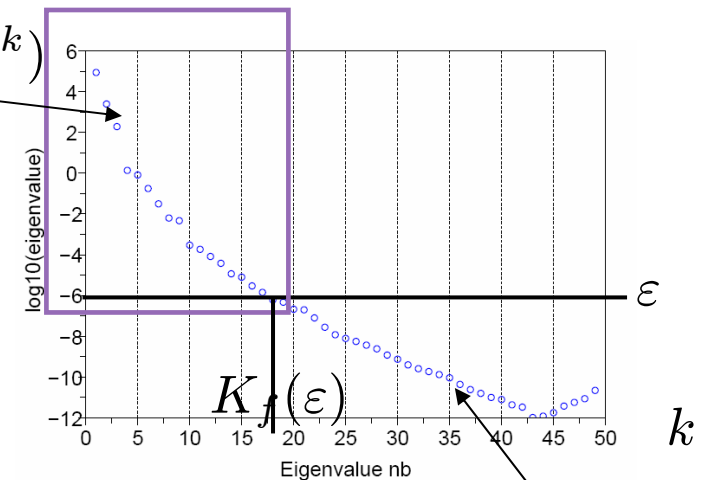
$$\varepsilon > 0$$

un seuil d'erreur. Si

$$K_f / \sum_{k=K_f+1}^N \lambda^k \leq \varepsilon \sum_{k=1}^N \lambda^k \quad (K_f = K_f(\varepsilon)),$$

alors on a l'estimation

$$\sum_{i=1}^N \|f^i - \Pi^{K_f} f^i\|_{0,\Omega}^2 \leq \varepsilon \sum_{i=1}^N \|f^i\|_{0,\Omega}^2.$$



Eigenvalue
residual
part

Ex éq. de la chaleur

“Réponse” de la solution à la donnée initiale et au second membre

$$\frac{d}{dt}(u, v)_{0,\Omega} + (u, v)_{1,0,\Omega} = (f, v)_{0,\Omega} g(t) \quad \text{for all } v \in H_0^1(\Omega), \quad t \in (0, T) \quad (1)$$

$$u(\cdot, t = 0) = u^0 \quad \text{in } \Omega. \quad (2)$$

$$S_f^N = \{f^1, \dots, f^N \in L^2(\Omega)\}$$

$$S_{u^0}^M = \{u^{0,1}, \dots, u^{0,M} \in L^2(\Omega)\}.$$

$$\Pi_f^{K_f} f = \sum_{k=1}^{K_f} (f, \Psi_f^k)_{0,\Omega} \Psi_f^k, \quad f \in L^2(\Omega), \quad \Pi_0^{K_0} u^0 = \sum_{\ell=1}^{K_0} (u^0, \Psi_0^\ell)_{0,\Omega} \Psi_0^\ell, \quad u^0 \in L^2(\Omega).$$

Dual basis construction

$$\frac{d}{dt}(\varphi_f^k, v)_{0,\Omega} + (\varphi_f^k, v)_{1,0,\Omega} = (\Psi_f^k, v)_{0,\Omega} g(t) \quad \text{for all } v \in H_0^1(\Omega), t \in (0, T),$$

$$\varphi_f^k(\cdot, t = 0) = 0 \quad \text{in } \Omega$$

$$\frac{d}{dt}(\varphi_0^\ell, v)_{0,\Omega} + (\varphi_0^\ell, v)_{1,0,\Omega} = 0 \quad \text{for all } v \in H_0^1(\Omega), t \in (0, T),$$

$$\varphi_0^\ell(\cdot, t = 0) = \Psi_0^\ell \quad \text{in } \Omega$$

The solution $\tilde{u}$ of the approximate heat equation problem

$$\frac{d}{dt}(\tilde{u}, v)_{0,\Omega} + (\tilde{u}, v)_{1,0,\Omega} = (\Pi_f^{K_f} f, v)_{0,\Omega} g(t) \quad \text{for all } v \in H_0^1(\Omega), t \in (0, T),$$

$$\tilde{u}(\cdot, t = 0) = \Pi_0^{K_0} u^0 \quad \text{in } \Omega$$

writes in closed form

$$\tilde{u}(\cdot, t) = \sum_{k=1}^{K_f} (f, \Psi_f^k)_{0,\Omega} \varphi_f^k(\cdot, t) + \sum_{\ell=1}^{K_0} (u^0, \Psi_0^\ell)_{0,\Omega} \varphi_0^\ell(\cdot, t) \quad \forall t \in [0, T].$$

Estimation d'erreur a priori

En utilisant le lemme de Gronwall,

$$\sum_{i=1}^N \|(u^i - \tilde{u}^i)(\cdot, t)\|_{0,\Omega}^2 \leq \varepsilon \left[2 \sum_{i=1}^N \|u^{0,i}\|_{0,\Omega}^2 + \sum_{i=1}^N \|f^i\|_{0,\Omega}^2 [A(t)]^2 \right] \exp \left(-\frac{t}{[C(\Omega)]^2} \right)$$

$$\text{with } A(t) = \int_0^t \exp \left(\frac{1}{2} \frac{s}{[C(\Omega)]^2} \right) |g(s)| ds.$$

Deuxième zoom : Projet DIGIPLANTE

Resp. P. H. Cournède